

рис. 2. Энергетическая схема электронно-возбужденных состояний изолированной молекулы ВРА.

Квантово-химические алгоритмы и программы основаны на полуэмпирическом методе частичного пренебрежения дифференциальным перекрытием со спектроскопической параметризацией (ЧПДП/С). Точные структурные параметры исследованной молекулы (длины связей, валентные и торсионные углы) не известны, поэтому геометрия молекулы в основном состоянии оптимизирована с помощью метода MM2 (Chem Office). Экспериментальные данные получены на спектрофотометре CM2203.

Анализ расчетов показал, что дезактивация энергии возбуждения в ВРА происходит по каналам внутренней и интеркомбинационной конверсий. Значение квантового выхода флуоресценции ВРА, полученное из расчета $\phi_f = 0.0025$ ($\phi_f = 0.0011$), связано с конкуренцией процессов интеркомбинационной конверсии и испускания. Рассчитанные константы фотофизических процессов, рассеяющих нижнее синглетное возбужденное состояние, равны: $k_f = 7 \times 10^7 \text{ c}^{-1}$ и $k_{ST} = 3 \times 10^{10} \text{ c}^{-1}$. В докладе обсуждается природа электронных возбужденных состояний ВРА.

Результаты были получены в рамках выполнения государственного задания Минобрнауки России.

Влияние технологии изготовления тонких пленок ZnO на внутренние механические напряжения

Выломов Леонид Павлович

Гавриляк Алина Маратовна, Лукашев Владимир Сергеевич

Белов Кирилл Николаевич

Южно-Уральский государственный университет

Подгорнов Федор Валерьевич, к.ф.-м.н.

leonvylomov@gmail.com

Оксид цинка ZnO является широкозонным полупроводником ($\Delta E_g = 3.37 \text{ эВ}$), обладающим одной из самых больших энергий связи экситонов ($\approx 60 \text{ мэВ}$), что делает перспективным его применение при создании компонентной базы электроники, в частности, ультрафиолетовых светодиодов.

В настоящее время известно несколько технологий изготовления тонких пленок оксида цинка, самой доступной из которых является оксидирование тонких пленок цинка, нанесенных на подложку. Одной из проблем, возникающих при использовании данной технологии, является возникновение внутрипленочных механических напряжений приводящих к изменению параметров и свойств пленок оксида цинка. Наиболее эффективным методом оценки величины механических напряжений и их пространственного распределения является спектроскопия комбинационного рассеяния света.

Целью данной работы является оценка влияния температуры стеклянной подложки при нанесении пленок цинка на величину механических напряжений в пленках ZnO методом комбинационного рассеяния.

Данный метод основан на том, что разность характерных частот спектральных линий $\Delta\omega$ в спектре комбинационного рассеяния линейно зависит от механического напряжения (σ):

$$\Delta\omega = k\sigma, \quad (1)$$

где k – коэффициент пропорциональности.

В рамках данной работы исследовались пленки ZnO (толщина 40 нм), полученные окислением пленок цинка, изготовленные электроно-лучевым методом при разных температурах стеклянных подложек (при температуре подложки 28°C и 100°C во время изготовления), исследование проведено на спектрометре комбинационного рассеяния света NT-MDT Integra Spectra на длине волны возбуждающего излучения 472,8 нм.

Спектры исследуемых тонких пленок ZnO имеет только один пик, максимум которого расположен около 444 см^{-1} , что соответствует вкладу атома кислорода. Наблюдается смещение спектрального положения

данного пика (рис.1). Данный факт свидетельствует о наличии механического напряжения в тонкой пленке оксида цинка. К сожалению, исследование тонких пленок ZnO 100 °С затруднено, поскольку не виден ее пик на спектре из-за фотолюминесценции.

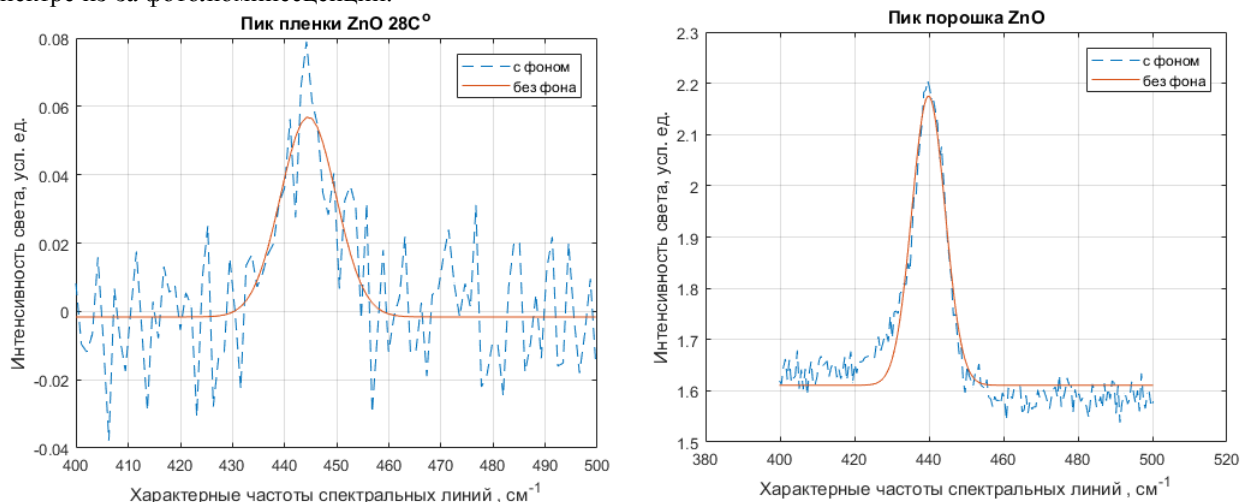


рис. 1. Пики тонкой пленки ZnO 28 °С (444 см^{-1}) и порошка ZnO (440 см^{-1}).

Влияние технологии нанесения тонких пленок оксида цинка на параметры их запрещенной зоны

Гавриляк Алина Маратовна

Выломов Леонид Павлович, Гавриляк Максим Витальевич, Лукашев Владимир Сергеевич

Южно-Уральский государственный университет

Подгорнов Федор Валерьевич, к.ф.-м.н.

AlinaIshmurzina1609@gmail.com

Оксид цинка ZnO – широкозонное полупроводниковое соединение с шириной запрещенной зоны $E_g = 3.436\text{ эВ}$ [1]. Благодаря своим уникальным оптическим и электрофизическим свойствам, оксид цинка обладает большим потенциалом для различных практических применений. Наличие примесей или изменение состава может привести к сдвигу запрещенной зоны E_g . Различия соотношения кислорода и цинка, при различных условиях нанесения и последующего отжига тонких пленок ZnO, значительно влияет на свойства данного материала. Таким образом, целью работы является исследование влияния технологии нанесения тонких пленок оксида цинка на параметры ширины запрещенной зоны.

Формирование тонких пленок оксида цинка происходило при двух различных условиях. В первом случае гранулированный цинк наносился на стеклянную подложку при комнатной температуре (28°C) с помощью метода электронно-лучевого напыления. Во втором случае перед напылением стеклянная подложка нагревалась до температуры 150°C . На последующем этапе тонкие пленки цинка окислялись в кислородной среде при температуре 300°C в течение 8 часов для получения тонких пленок оксида цинка.

С помощью электронного микроскопа JSM-7001F получены изображения поверхности тонких пленок цинка. Как видно из (рис. 1), пленки цинка, нанесенные на подложку при комнатной температуре, обладают «чешуйчатой» структурой, а цинк, нанесенный на нагретую подложку, представляет собой гексагональные наночастицы. Характерный размер данных частиц равен примерно 200 нм.

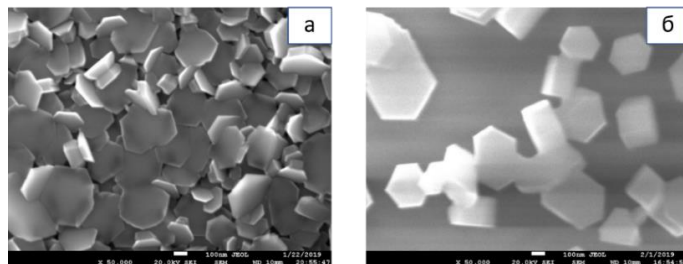


рис.1 Изображение поверхности пленки цинка, нанесенного на подложку а) при температуре 28°C б) при температуре 150°C